



TITLE:

7. Si(111)2×1再構成表面での原子配位と電子状態密度:化学擬ポテンシャル法(固体表面及び吸着子の理論,研究会報告)

AUTHOR(S):

星野, 敏春

CITATION:

星野, 敏春. 7. Si(111)2×1再構成表面での原子配位と電子状態密度:化学擬ポテンシャル法(固体表面及び吸着子の理論,研究会報告). 物性研究 1980, 33(4): 187-190

ISSUE DATE:

1980-01-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89914>

RIGHT:

7. Si(111) 2×1再構成表面での原子配位と電子状態密度

— 化学 擬ポテンシャル法 —

阪大理 星 野 敏 春

Si(111) 2×1 再構成面について(i) Haneman のイオン性モデル¹⁾, (ii) Selloni & Tosatti²⁾ の共有性モデルの2つが提唱されているが、未だ正しい微視的モデルは確立していない³⁾

我々は Anderson⁴⁾ によって始められ Bullett⁵⁾ がダイヤモンド構造物質の“ボンド”の長さとエネルギーを計算するのに用いた化学擬ポテンシャル法を表面に拡張し、上記の2つのモデルの可能性を調べた。例えば、イオン性モデルとしては図1-2に示すよ

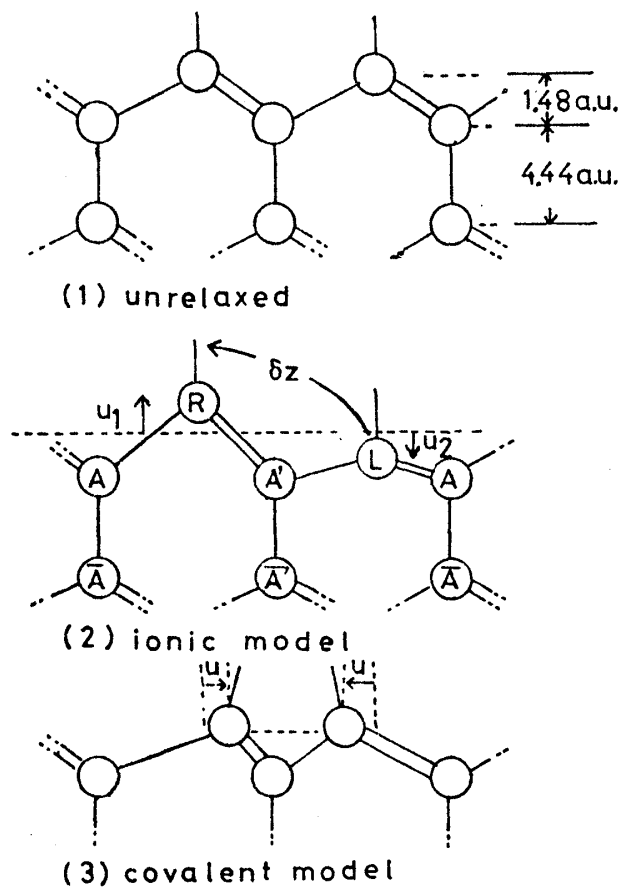


図1 Si(111)表面の2×1再構成。表面原子当り“ダングリングボンド”は1つで、共有性モデルの場合には、そのボンド方向はuで決まる。

うに1層目の原子の上がり(u_1), 下がり(u_2)のみを考慮する。そのような再構成に伴う電荷移動(δz)の効果も, 表面原子の“ダングリングボンド”の間に限っているが, セルフコンシステントに取り入れている。そのとき再構成によって生じる全エネルギーの変化は単位胞当り

$$\begin{aligned}
 \delta E(u_1, u_2, \delta z) = & 4\delta\epsilon_{ar'}(u_1, u_2) + 2\delta\tilde{\epsilon}_{ar}(u_1, u_2) + 4\delta\epsilon_{al}(u_1, u_2) \\
 & + 2\delta\tilde{\epsilon}_{al}(u_1, u_2) + 2\delta\epsilon_{aa}(u_1, u_2) + 2\delta\epsilon_{aa'}(u_1, u_2) \\
 & + (1+\delta z)(\epsilon_r^{dang}(u_1) + U\delta z) + (1-\delta z)(\epsilon_l^{dang}(u_2) - U\delta z) \\
 & - 2\epsilon^{dang}(0) - U(\delta z)^2 - 2\alpha(\delta z)^2 + (6 + \frac{3}{2}\delta z)\epsilon_{ar}^{electro}(u_1) \\
 & + (6 - \frac{3}{2}\delta z)\epsilon_{al}^{electro}(u_2) - 12\epsilon^{electro}(0)
 \end{aligned} \tag{1}$$

と表わされる。第1～4項は1層目と2層目の間の“ボンドエネルギー”の変化, 第5と6項は2層目と3層目の間の“ボンドエネルギー”の変化, 第7～9項は表面原子の“ダングリングボンド”のエネルギー変化, 第10項は原子内クーロン相互作用($U \sim 7\text{eV}$)の重複算入を補正し, 第11項は表面原子のイオン化によって生じるマーデルングエネルギー($\alpha \sim 0.7\text{eV}$), 第12～14項は表面原子と2層目の原子の間の静電エネルギーの変化である。各“ボンドエネルギー”の変化は化学擬ポテンシャル法で計算される⁵⁾

上記のように簡単な強結合模型の場合には, 電荷移動は $\frac{\delta E}{\delta z} = 0$ より

$$\delta z = \frac{(\epsilon_l^{dang}(u_2) - \epsilon_r^{dang}(u_1)) + \frac{3}{2}(\epsilon_{al}^{electro}(u_1) - \epsilon_{ar}^{electro}(u_2))}{2(U - 2\alpha)} \tag{2}$$

となり, 式(1)は u_1, u_2 の2つの関数になる。

計算によると $u_1 \sim 0.20d$, $u_2 \sim 0.18d$ (d はバルクでのボンド長さ)の時 $\delta z \sim 0.38$, $\delta E \sim -2.38\text{eV}$ となる。エネルギー変化の成分を調べると, 表面原子の電荷移動と荷電子が殻電子と直交することにより生じるエネルギーの高まりの変化の重要なことがわかる⁶⁾。同様の計算を共有性モデル(図1-3)について行なうと, 表面原子が寄り合うことによる“ダングリングボンド”間のエネルギーの低下よりも表面原子と2層目の間の“バックボンド”のエネルギーの高まりの方が大きくなる。以上の計算はイオン性モデ

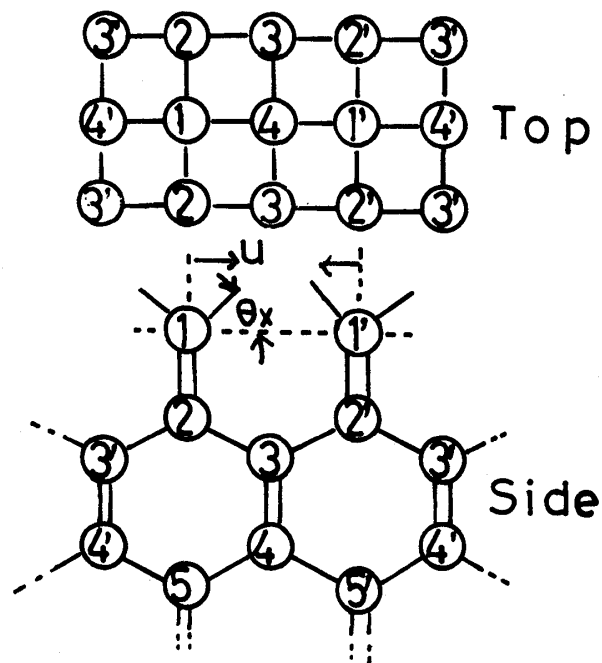


図2 Si(100) 表面の 2×1 (*symmetric dimer*) 再構成。
表面原子当り 2 個の“ダングリングボンド”があり、その
ボンドは回転の自由度 (θ_x) を持っている。

ルの優位を示している。一方、Si(100) 2×1 再構成面の場合 (図2) には表面原子の“ダングリングボンド”の方向性 (θ_x) の自由度があるため、それらが手を結ぶことにより生じるエネルギーの利得がかなり大きくなり ‘dimer model’⁶⁾ の可能性を我々の計算は示している。

又、Si(111) 2×1 再構成面でイオン化を考慮した表面の電子状態密度の予備的な (Bethe 近似に基づいている) 計算は実験結果⁷⁾ を定性的に再現する。

参考文献

- 1) D. Haneman, Phys. Rev. **121** (1961) 1093
- 2) A. Selloni and E. Tosatti, Solid State Commun. **17** (1975) 387
- 3) 張紀久夫, 固体物理 **14** (1979) 38.
- 4) P. W. Anderson, Phys. Rev. **181** (1969) 25
- 5) D. W. Bullett, J. Phys. C (GB) **8** (1975) 2695; **8** (1975) 2707

- 6) D. J. Chadi (例えば Phys. Rev. Letters. 43 (1979) 43) もエネルギーの計算から表面原子配位を決定する研究を行なっているが、電荷移動の self-consistency も core-orthogonalization も考慮されていない。
- 7) J. E. Rowe and H. Ibach, Phys. Rev. Letters 32 (1974) 421

8. 結晶の表面再構成と電子構造

物性研 菅 野 暁

結晶表面の、(i)原子配置、(ii)電子構造の2つは共に、現在の所 unknown である。今迄になされた、或はこれからなされようとする理論研究は、(A)、(B)、(C)の3つに分類出来る。(A)は(i)又は(ii)のどちらか1つを仮定して他を求めるもので、イオン結晶の buckling の計算、bulk で求めた力の定数を用いた Si(100) 面の再構成の計算等があげられる。

(B)は(i)と(ii)を完全に self-consistent にはしないが、うまい starting model をえらんで self-consistency への急速な convergence が得られるようにする理論である。この理論では、(ii)を仮定して出発するものと、(i)を仮定して出発するものの2種類がある。前者の理論としては Harrison の bond orbital model, Chadi の parametrized tight binding 法の適用等があげられる。いずれも共有結合結晶に小さなイオン性を導入するものである。後者の線上にあるが convergence は保証されていないものとして、Tossatti & Anderson の理論があるが、完全な後者型の理論はないように思う。

(C)は(i)と(ii)を完全に self-consistent にする大型の計算で、Freeman のグループ、分子研の塚田・里子グループ等で研究が進められている。

この講演では Si(100) 面の再構成に関する Chadi の理論を例にとって、(B)型の研究の重要性が強調された。